



TITLE:

表紙・原稿作成要領・編集後記・  
裏表紙ほか

AUTHOR(S):

---

CITATION:

表紙・原稿作成要領・編集後記・裏表紙ほか. 物性研究 2003, 79(6):  
1039-1039

ISSUE DATE:

2003-03-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/97441>

RIGHT:

# 軌道自由度を持つ一次元ハバードモデルの電子状態

三重大 工学部 佐野和博<sup>1</sup>  
名古屋大学 理学部 大野義章

## 1 始めに

最近、軌道自由度を持つ強相関電子系が注目を集めている。軌道自由度があると、電子間のクーロン相互作用は複数のバンド間にさまざまな相互作用をもたらすことになるのでそこに現れる物理は興味深いものと思われる。ここでは以下のようなハミルトニアンで記述される一次元系のモデルを考える。

$$\begin{aligned}
 H = & - \sum_{i,m,\sigma} t_m (c_{i,m,\sigma}^\dagger c_{i+1,m,\sigma} + h.c.) + U \sum_{i,m} n_{i,m,\uparrow} n_{i,m,\downarrow} + \Delta \sum_{i,\sigma} (n_{i,a,\sigma} - n_{i,b,\sigma}) \\
 & + U' \sum_{i,\sigma} n_{i,a,\sigma} n_{i,b,-\sigma} + (U - J) \sum_{i,\sigma} n_{i,a,\sigma} n_{i,b,\sigma} \\
 & - J \sum_{i,m,\sigma} (c_{i,a,\uparrow}^\dagger c_{i,a,\downarrow} c_{i,b,\downarrow}^\dagger c_{i,b,\uparrow} + h.c.) - J \sum_{i,m,\sigma} (c_{i,a,\uparrow}^\dagger c_{i,a,\downarrow}^\dagger c_{i,b,\uparrow} c_{i,b,\downarrow} + h.c.) \quad (1)
 \end{aligned}$$

ここで、 $m(m = a, b)$  は軌道の自由度をあらわすものとし、サイト上の相互作用として  $U$  は同一軌道内のクーロン斥力、 $U'$ 、 $J$  は、それぞれ異なる軌道間のクーロン斥力とフント結合をあらわす。電子のトランスファーは同一軌道間のみにあるものとして  $t_a = t_b = 1$  とし、 $U$  は  $U'$  と  $J$  の間に  $U = U' + 2J$  なる関係があるものとする。軌道間のエネルギー準位の差は  $\Delta$  で、電子のフィリング  $n$  は unit cell 当たりの電子数である。すでに上記のモデルとほぼ同等のものが DMRG などの数値的な方法により、調べられているがそれらは主に強磁性状態に注目している [1,2]。ここではむしろ常磁性の領域に注目し特にそこで超伝導状態が存在するか否かに焦点を当てて電子状態を調べた。

## 2 計算手法と結果

上記のモデルハミルトニアンで表わされる有限系を数値的対角化法により調べる。使用したシステムは 6 ユニット中に 8 個の電子を持つ系である。システムサイズを変えたり電子数を変えたりしても計算してあるが、以下に述べる結果は定性的には変わらない。超伝導状態になっているかどうかの判定には、Luttinger 流体論を援用し Luttinger-liquid パラメータ  $K_\rho$  を数値的に求め、それが 1 を超えるかどうかで判定した。 $\Delta$  がゼロの場合は、すでに知られているように  $U'/t - J/t$  なるパラメータ平面上で見ると  $U'$  と  $J(U' \sim J$  とする) が大きな所では基底状態が強磁性 (complete

<sup>1</sup> E-mail:sano@phen.mie-u.ac.jp

ferro) となる領域がある [1]。今  $\Delta$  をバンド幅程度まで増やして行くと partial ferro の領域が生じ、それが常磁性の領域に張り出してくるようになる。

この時、常磁性領域で  $K_\rho$  を求めたところ partial ferro 相の手前で  $K_\rho$  の値が 1 を超え超伝導状態と考えられる領域が存在することがわかった (図 1: ここでは  $U'/t = J/t$  となるライン上で見ている)。そこからさらに相互作用を強くすると基底状態は partial ferro 状態へとクロスする事になる。1 次摂動近似で求めた  $K_\rho$  の値と比較した所、相互作用が弱い所で対角化の結果とほぼ一致しているので、サイズ依存性はあまり大きくないと推定される。図 2 に同じ系を、今度は  $U'/t$  と  $J/t$  を変えた時の相図を示す。この図からわかるように partial ferro の領域に隣接する形で超伝導の領域が見られる。

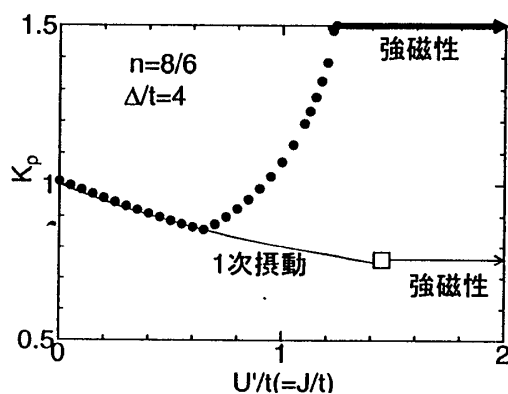


図 1:  $U'/t (= J/t)$  の関数として見た  $K_\rho$

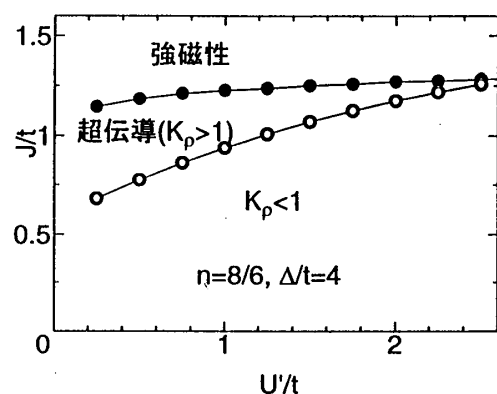


図 2:  $U'/t - J/t$  平面で見た相図

### 3 まとめと議論

2つの原子軌道を持つ一次元ハバードモデルの電子状態を数値的対角化法と Luttinger 流体論に基づき調べた。2つの原子軌道間に適度なエネルギー差があるとき、partial ferro 相の手前で超伝導状態と考えられる領域を見つける事が出来た。

この超伝導状態の領域は、現実的なパラメータ領域と考えられる  $U'/t > J/t$  となる領域にも広がっているので、実際の物質においても強磁性相の近くに超伝導相が出現する事が期待できる。なお、この超伝導相は常磁性の領域にあるもので complete ferro 相内の  $U'/t < J/t$  となる領域で期待される強磁性の超伝導相 [1] とはまったく異なるものである。

### 参考文献

- [1] H. Sakamoto, T. Momoi and K. Kubo, Phys. Rev. **B65** (2002), 224403
- [2] K. Kusakabe, S. Watanabe and Y. Kuramoto, J. Phys. Soc. Jpn. **71** (2002), 311

## LaCoO<sub>3</sub>における軌道波

名古屋大学ベンチャービジネスラボラトリー 石川 敦史<sup>1</sup>

名古屋大学 理学部 水貝 俊治<sup>2</sup>

軌道自由度を持つ 3d 遷移金属化合物において、軌道の集団励起（軌道波）の存在が予測され、ラマン散乱、共鳴 X 線散乱等の実験で軌道波の観測が期待されている。このような物質のひとつである LaCoO<sub>3</sub> は菱面体構造をもつペロブスカイト型酸化物であり、Co<sup>3+</sup> イオンの 3d 軌道は結晶場によって 3 重の  $t_{2g}$  軌道と 2 重の  $e_g$  軌道に分裂している。3d 軌道には 6 個の電子が入っており、低温基底状態は  $t_{2g}$  軌道が全て満たされている  $t_{2g}^6 e_g^0$ ,  $S = 0$  のスピン-軌道配列を取るため、Low Spin (LS) 状態と呼ばれる非磁性絶縁相である。温度を上げていくと 100 K 付近で常磁性絶縁体へと転移し、さらに 500 K 付近で常磁性金属相への転移を起こすことが知られており、常磁性相においてはスピン-軌道配列は  $t_{2g}^5 e_g^1$ ,  $S = 1$  の Intermediate Spin (IS) 状態であると考えられている。Korotin ら [1] が提唱したモデルでは、Co-3d 軌道が O-2p 軌道と強く混成しその結果として IS 状態が HS 状態 ( $t_{2g}^4 e_g^2$ ,  $S = 2$ ) よりエネルギー的に低くなると説明している。実験的には光電子分光の結果 [2] が Co 軌道の  $d^6$  電子配列に対して  $d^7 \underline{L}$  と  $d^8 \underline{L}^2$  配列が大きな比率で混じり合っていることを示している。また、Korotin らは IS 相における軌道秩序の発生を予言し、これによって IS 相が安定化していると主張している。IS 相における軌道秩序の存在は明確に確認されてはいないが、これらの結果は IS 相で軌道波が現われる可能性を示唆している。

LS 相と IS 相における軌道波とその変化を観測するために我々は LaCoO<sub>3</sub> 単結晶でラマン散乱実験を行なった。今回は、フォノンに関する異常を報告する。図 1 に LaCoO<sub>3</sub> の 800 cm<sup>-1</sup> までのラマンスペクトルの温度変化を示す。偏光方向は偽立方晶の  $(x,x)$  および  $(x,y)$  方向に取っている。結晶の対称性 ( $R\bar{3}c$ ) からラマン活性なモードは  $A_{1g} + 4E_g$  であり、 $(x,x)$  および  $(x,y)$  方向に偏光方向を取った場合これらのモードは全て観測される。 $(x,x)$  方向においては、5 K で 88, 174, 434, 587, 668 cm<sup>-1</sup> にフォノンと見られるピークが観測された。温度を上昇させると、いくつかのフォノン・スペクトルにおいて LS-IS 転移点付近でエネルギーおよび強度が明らかに変化している。特に大きな変化としては、5 K で 88 cm<sup>-1</sup> に位置しているフォノンは 100 K で大きく低エネルギー側にシフトし、300 K では 63 cm<sup>-1</sup> にピークが移動している。また、434 cm<sup>-1</sup> のフォノンは 100 K 付近を境に強度が大きく減少している。587, 668 cm<sup>-1</sup> のピークは温度の上昇とともに低エネルギー側へシフトするとともに強度が大きく増大しブロードなピークとなっている。 $(x,y)$  方向では、587 cm<sup>-1</sup> のピークのみが大きな強度を持って観測され、 $(x,x)$  方向の 434 cm<sup>-1</sup> のフォノンと同様に 100 K 付近で強度が大きく減少している。これらのフォノンは CoO<sub>6</sub> 八面体の酸素原子が変位する振動

<sup>1</sup> E-mail: a.ishikawa@nucc.cc.nagoya-u.ac.jp

<sup>2</sup> E-mail: sugai@nucc.cc.nagoya-u.ac.jp

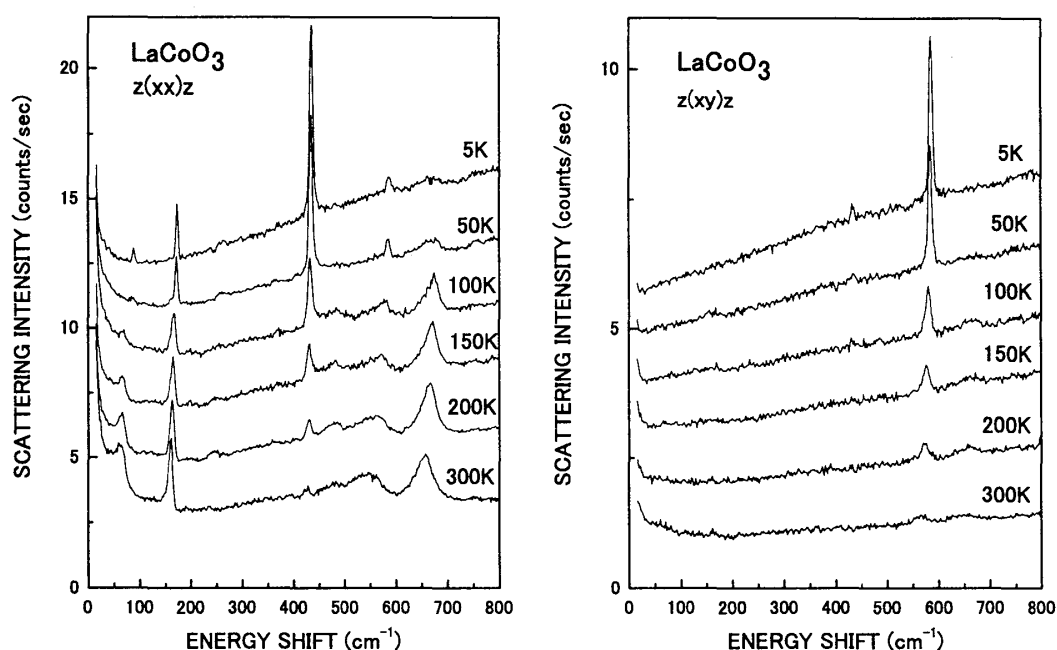


図 1:  $\text{LaCoO}_3$  のラマンスペクトルの温度変化 (左:  $(x,x)$  偏光方向、右:  $(x,y)$  偏光方向)

モードで、強度が変化しない  $174\text{ cm}^{-1}$  の La の振動モードと温度依存性が大きく異なる。

中性子散乱による構造解析 [3] からは LS-IS 転移点で結晶構造の変化は観測されておらず、このようなフォノンの変化は電子構造の変化に由来していると考えられる。可能性の一つとしては、短距離の軌道秩序による局所的な格子の歪みの存在が考えられる。赤外吸収のフォノンスペクトル [4] からも温度上昇に伴うフォノン構造の変化が報告されており、IS 相におけるヤーンテラー型の局所的な格子歪みによるものと解釈されている。今回ラマン散乱から得られたスペクトルの温度変化は赤外吸収スペクトルの温度変化と比較すると LS-IS 転移にともなう変化が明らかである。特に、 $(x,x)$  方向における  $434\text{ cm}^{-1}$  のフォノンと  $(x,y)$  方向における  $587\text{ cm}^{-1}$  のフォノンの 100 K 以上での強度の減少は IS スピンを持つ  $\text{Co}^{3+}$  イオンの数の増加により大きな緩和を伴う軌道秩序が発生したためであると考えられる。

## 参考文献

- [1] M. A. Korotin, S. Yu. Ezhov, I. V. Solovyev, V. I. Anisimov, Phys. Rev. B **54** (1996), 5309.
- [2] T. Saitoh, T. Mizokawa, A. Fujimori, M. Abbate, Y. Takeda, M. Takano, Phys. Rev. B **55** (1997), 4257.
- [3] S. Xu, Y. Moritomo, K. Mori, T. Kamiyama, T. Saitoh, A. Nakamura, J. Phys. Soc. Jpn. **70** (2001), 3296.
- [4] S. Yamaguchi, Y. Okimoto, Y. Tokura, Phys. Rev. B **55** (1997), R8666.

## 編集後記

小雪の舞う寒さに身を震わせていたのが、つい数週間前だというのに、ここ数日は、マフラーや手袋が要らないほど春らしくなってきた。この時期には、博士課程を修了して新天地へ巣立つ準備をしておられる若手研究者の方も多くおられると思う。

最近の若手研究者の就職事情は、不景気な日本の現状とは裏腹に、売り手市場のようである。もちろんパーマネントなポストに着ける人は、これまでどおり限られているが、任期付きのポストクのような研究職は、学振、CREST、さがし等、まるで、ひと昔前の日本経済のバブルのようだ。某K事業団にプロジェクトが採用されたとある知人も、ポストクの応募を募ったところ、思いのほか、応募者が少なく、いい人材の確保にかなり苦労されたらしい。競合するプロジェクトが並行にいくつも走っているためである。これは、科学振興に大きな国家予算が投じられて、研究支援が充実してきたとも解釈できるが、他方、優秀な若手の人材が大学から育っていないという現状を反映しているのでもあろう。これは私の勤めている大学に限った話かもしれないが、最近、優秀な学生ほど、修士で大学を出ていって企業に就職する傾向が、年々強くなっているように思える。これは物理の基礎研究に魅力がなくなったためであろうか。それとも、任期付きのポストクのポジションが増える一方、大学改革の影響で身分の保証された研究職が減っている現状が、優秀な人材を遠ざけているのであろうか。

前述の知人から聞いた某K事業団関係者の弁によると、ほんの数年前までは「脳」の研究に重点的に研究費が配分されていたが、目に見える成果が出にくいという理由で、研究費が削減され、代わりに今ではIT関連、ナノテク関連に重点的に配分されているらしい。日本の財政を圧迫してでも増大する研究支援は、その研究成果が産業、そして低迷する日本経済に還元されることを狙って重点的に行なわれているのであろうが、流行り廃りに振りまわされる配分方針にいささか辟易とする。数年の短期間で実用化を目指すような研究なら、大学よりも企業で行なう方が有利であろう。まして、数年後の身分が保証されない研究員よりも、企業の研究所を優秀な学生が選択するのは当然である。いずれ“バブル”は崩壊するであろうが、その余波が、応用、実用に直接結びつかない基礎研究を地道に進めている研究者に及ばないことを願う。

(S. F.)

## [ 物性研究 ]

### 編 集 長

早川 尚男 (京大・人環)

### 編集委員

池田 浩章 (京大・理・物理)  
北村 光 (京大・理・物理)  
中尾 裕也 (京大・理・物理)  
藤本 聡 (京大・理・物理)  
加藤 将樹 (京大・理・化学)  
佐々木 豊 (京大・低温センター)  
常次 宏一 (京大・基研)  
村瀬 雅俊 (京大・基研)  
森成 隆夫 (京大・基研)  
大木谷 耕司 (京大・数研)

### 各地編集委員

飯間 信 (北大・電子研)  
早川 美德 (東北大・理・物理)  
藤本 仰一 (東大・教養・基礎科第一)  
堀田 貴嗣 (原研・先端研)  
出口 哲生 (お茶の水大・理・物理)  
永井 寛之 (信州大・理・物理)  
岡本 祐幸 (分子科学研)  
倭 剛久 (名大・理・物理)  
池田 研介 (立命館大・理工・物理)  
関本 謙 (ルイパスツール大・物理)  
菊池 誠 (阪大・理・物理)  
水口 毅 (大阪府大・工・数理工学)  
市岡 優典 (岡大・理・物理)  
吉森 明 (九大・理・物理)

E-mail: busseied@yukawa.kyoto-u.ac.jp

URL: <http://www2.yukawa.kyoto-u.ac.jp/~busseied/>

---

物 性 研 究 第 79 卷第 6 号 (平成 15 年 3 月号) 2003 年 3 月 20 日 発行

発行人 早 川 尚 男

〒606-8502 京都市左京区北白川追分町  
京都大学湯川記念館内

印刷所 昭和企業組合  
昭和堂印刷所

〒606-8225 京都市百万遍交差点上ル東側  
TEL (075) 721-4541 ~ 3

発行所 物性研究刊行会

〒606-8502 京都市左京区北白川追分町  
京都大学湯川記念館内

年額 19,200円

---

## [物性研究]

### 編集長

早川 尚男 (京大・人環)

### 編集委員

池田 浩章 (京大・理・物理)  
北村 光 (京大・理・物理)  
中尾 裕也 (京大・理・物理)  
藤本 聡 (京大・理・物理)  
加藤 将樹 (京大・理・化学)  
佐々木 豊 (京大・低温センター)  
常次 宏一 (京大・基研)  
村瀬 雅俊 (京大・基研)  
森成 隆夫 (京大・基研)  
大木谷 耕司 (京大・数研)

### 各地編集委員

飯間 信 (北大・電子研)  
早川 美徳 (東北大・理・物理)  
藤本 仰一 (東大・教養・基礎科第一)  
堀田 貴嗣 (原研・先端研)  
出口 哲生 (お茶の水大・理・物理)  
永井 寛之 (信州大・理・物理)  
岡本 祐幸 (分子科学研)  
倭 剛久 (名大・理・物理)  
池田 研介 (立命館大・理工・物理)  
関本 謙 (ルイパスツール大・物理)  
菊池 誠 (阪大・理・物理)  
水口 毅 (大阪府大・工・数理工学)  
市岡 優典 (岡大・理・物理)  
吉森 明 (九大・理・物理)

E-mail: busseied@yukawa.kyoto-u.ac.jp

URL: <http://www2.yukawa.kyoto-u.ac.jp/~busseied/>

---

物 性 研 究 第 79 卷第 6 号 (平成 15 年 3 月号) 2003 年 3 月 20 日 発行

発行人 早 川 尚 男

〒606-8502 京都市左京区北白川追分町  
京都大学湯川記念館内

印刷所 昭和企業組合  
昭和堂印刷所

〒606-8225 京都市百万遍交差点上ル東側  
TEL (075) 721-4541 ~ 3

発行所 物性研究刊行会

〒606-8502 京都市左京区北白川追分町  
京都大学湯川記念館内

年額 19,200円

---



## 会員規定

### 個人会員

#### 1. 会 費：

当会の会費は前納制になっています。したがって、3月末までに次年度分の会費をお振込み下さい。

**年会費 9,600円**

1st Volume (4月号～9月号)

2nd Volume (10月号～3月号)

振替用紙は毎年2月号にとじ込んであります。振替用紙が必要な場合は、下記までご請求下さい。郵便局の用紙でも結構です。通信欄に送金内容を必ず明記して下さい。

郵便振替口座 京都 01010-6-5312

#### 2. 送本中止の場合：

送本の中止は年度の切れ目しかできません。次の年度より送本中止を希望される場合、できるだけ早めにご連絡下さい。中止の連絡のない限り、送本は自動的に継続されますのでご注意下さい。

#### 3. 送本先変更の場合：

住所、勤務先の変更などにより、送本先が変わる場合は、すぐにご連絡下さい。

#### 4. 会費滞納の場合：

正当な理由なく1年以上の会費を滞納された場合は、送本を停止することがありますので、ご注意下さい。

### 機関会員

#### 1. 会 費：

学校、研究所等の入会、及び個人でも公費払いのときは機関会員とみなし、**年会費 19,200円**です。学校、研究所の会費の支払いは、後払いでも結構です。申し込み時に、支払いに書類（請求、見積、納品書）が各何通必要かをお知らせ下さい。当会の請求書類で支払いができない場合は、貴校、貴研究所の請求書類をご送付下さい。

#### 2. 送本中止の場合：

送本の中止は年度の切れ目しかできません。次の年度より送本中止を希望される場合、できるだけ早めにご連絡下さい。中止の連絡のない限り、送本は自動的に継続されますのでご注意下さい。

**雑誌未着の場合：発行日より6ヶ月以内に下記までご連絡下さい。**

## 物 性 研 究 刊 行 会

〒606-8502 京都市左京区北白川追分町 京都大学湯川記念館内

電話 (075)722-3540, 753-7051

FAX (075)722-6339

E-mail busseied@yukawa.kyoto-u.ac.jp

物性研究 79-6 (3月号) 目次

○講義ノート

「1次元非対称単純排他過程の厳密解」……………笹本 智弘…… 881

○研究会報告

「スクッテルダイト化合物研究の現状と展望」…………… 926

「軌道自由度を持つ強相関電子系の理論の進展」…………… 966

○掲示板

基礎物理学研究所研究会「電磁波と生体への影響」……………1038

○編集後記……………1039

○目 録 (Vol. 78, 79) ……………1041

物性研究 79-6 (3月号) 目次

○講義ノート

「1次元非対称単純排他過程の厳密解」……………笹本 智弘…… 881

○研究会報告

「スクッテルダイト化合物研究の現状と展望」…………… 926

「軌道自由度を持つ強相関電子系の理論の進展」…………… 966

○掲示板

基礎物理学研究所研究会「電磁波と生体への影響」……………1038

○編集後記……………1039

○目 録 (Vol. 78, 79) ……………1041